



TITLE:

一次元格子熱伝導系における定常測度の漸近挙動と系の対称性(複雑な多谷ポテンシャルエネルギー面上で生起する動力学諸問題-タンパク質とその周辺-,研究会報告)

AUTHOR(S):

上田, 彰; 武末, 真二

---

CITATION:

上田, 彰 ...[et al]. 一次元格子熱伝導系における定常測度の漸近挙動と系の対称性(複雑な多谷ポテンシャルエネルギー面上で生起する動力学諸問題-タンパク質とその周辺-,研究会報告). 物性研究 2006, 86(1): 61-66

ISSUE DATE:

2006-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110435>

RIGHT:

# 一次元格子熱伝導系における定常測度の漸近挙動と系の対称性

大阪府立大学 工学研究科 上田 彰<sup>1</sup>

京都大学 理学研究科 武末 真二<sup>2</sup>

## 1 はじめに

近年、線形領域を超えた一般の非平衡定常系に対し、熱力学や統計力学を拡張しようとする試みが、新たな展開を迎えつつある。まず、ゆらぎ定理 (fluctuation theorem) や Jarzynski 等式のような非平衡過程に対する新たな関係式が発見された。また、分子モーターのようなメソスコピック系で、エネルギー効率等の熱力学的性質が議論されるようになったことも重要な進展である。これに伴い、ラチェット系などの新たなモデルが研究対象となり、ゆらぎが重要となるスケールでのエネルギー論の構築が試みられている。さらに、ASEP などの非平衡定常状態が正確に求められる可解モデルの研究も進み、加法性や弱カノニカル性などの興味深い性質が明らかになってきている。

さて、格子熱伝導系は典型的な非平衡定常系である。ラチェット系や ASEP などと異なり、ハミルトニアンで記述されるという点でより基本的であるとも言える。格子熱伝導系は長い研究の歴史を有するが、計算機の高速化に伴い、ようやく最近になって明らかになったことも多い。調和格子や可積分系では、温度勾配は形成されず、熱流が両端の熱浴の温度差に比例するということは以前から知られていた。しかし、Fermi-Pasta-Ulam (FPU) モデルのような非線形バネで相互作用する 1 次元系で、熱伝導率  $\kappa$  が系の大きさ  $N$  に対し  $\kappa \propto N^\alpha$  ( $\alpha \simeq 0.37$ ) のように発散するということが明らかになったのは、1997 年のことであった。それ以降の研究により、現在では、粒子間の相互作用だけを含み運動量が保存されるような系では、熱伝導率は 1 次元系では発散し、収束するためには 3 次元系が必要だと考えられている。一方、粒子相互の力だけでなく格子を作る基盤からの作用を含むような系では、1 次元系でも熱伝導率は収束する。ただし、この一般的なルールには例外も存在するので、真の理由はまだ明らかになっていないのかもしれない。(格子熱伝導全般については [1] が詳しい。例外的な系については、[2] を参照のこと。)

いずれにせよ、これまでの格子熱伝導系の研究は Fourier 則と熱伝導率のみに焦点が絞られ、非平衡定常状態を記述する分布の性質を調べようとする研究は乏しかった。しかし、非平衡系の統計力学を目指そうとすれば、当然分布が問題となるべきである。そこで、我々は、格子熱伝導系における非平衡定常状態を記述する分布の特性について研究を行うことにした。とはいえ、Gibbs 分布に対応するような大自由度の分布を数値的に調べるわけにはいかない。そこで、各サイトの粒子の運動量分布に着目し、Maxwell 分布からどのようにずれるのかについて調べた。熱伝導系では、局所平衡が実現し、その結果として局所的な温度や温度勾配について語るができるようになることが期待される。しかし、熱流を生み出すためには、

<sup>1</sup>E-mail: ueda@ms.osakafu-u.ac.jp

<sup>2</sup>E-mail: takesue@phys.h.kyoto-u.ac.jp

必ず局所平衡からのずれがなければならない。局所平衡からのずれは、サイト間の相関といった効果も生み出すが、運動量分布の Maxwell 分布からのずれとして現れる部分もあるはずである。このずれを詳しく見ることで、非平衡定常状態についての情報を得ようというのが本研究の目的である。

## 2 モデル

次のハミルトニアンで記述される一次元格子力学系を考えよう。

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m} + U(q_i) \right] + \sum_{i=0}^N V(q_{i+1} - q_i), \quad (1)$$

ただし  $q_i$  は  $i$  番目サイトにある粒子の変位、 $p_i$  はそれに共役な運動量、 $V(q_{i+1} - q_i)$  は粒子  $i, i+1$  間の相互作用ポテンシャル、 $U(q_i)$  は粒子  $i$  に対する基盤からのオンサイトポテンシャルを表す。また境界条件は、固定境界条件（すなわち、 $q_0 = q_{N+1} = 0$ ）を採用する。

ポテンシャル  $V$  と  $U$  を具体的に与えることでさまざまなモデルが考えられるが、以下では主に次の 3 種類のモデルを扱う。

- (i) FPU モデル:  $V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{4}q^4$ ,  $U(q) = 0$
- (ii)  $\phi^4$  モデル:  $V(q) = \frac{1}{2}q^2$ ,  $U(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{4}q^4$
- (iii) 戸田格子:  $V(q) = \exp(q) - q$ ,  $U(q) = 0$

これらの系に対し、両端の粒子だけを異なる温度の熱浴（以下では、粒子 1 が接触する熱浴の温度を  $T_L$ 、粒子  $N$  が接触する熱浴の温度を  $T_R$  とする。）に接触させしばらく放置すると、熱流を伴う非平衡定常状態が実現する。数値計算では、次のような熱浴を用いた。

**Langevin 熱浴** 揺動散逸関係が成り立つような速度に比例する抵抗力和とガウス白色雑音で表されるランダム力を付加する。すなわち、粒子 1 と粒子  $N$  の運動方程式は次のようになる。

$$\dot{p}_1 = -U'(q_1) + V'(q_2 - q_1) - V'(q_1) - \gamma_L p_1 + \xi_L(t)$$

$$\dot{p}_N = -U'(q_N) + V'(-q_N) - V'(q_N - q_{N-1}) - \gamma_R p_N + \xi_R(t)$$

ただし、 $\xi_L(t)$ ,  $\xi_R(t)$  はガウス白色雑音で、揺動散逸関係より  $\langle \xi_\alpha(t) \xi_\beta(t') \rangle = 2\gamma_\alpha T_\alpha \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t')$  ( $\alpha, \beta = R, L$ ) を満たす。

**Nose-Hoover 熱浴** 次式で表されるような決定論的力で表される熱浴。粒子 1 に対しては

$$\dot{p}_1 = -U'(q_1) + V'(q_2 - q_1) - V'(q_1) - \zeta p_1, \quad \dot{\zeta} = \frac{1}{\Theta} \left( \frac{p_1^2}{T_L} - 1 \right)$$

ただし、 $\Theta$  は適当な定数である。粒子  $N$  に対しても同様。

**熱壁** 系の両端に壁を置き、粒子が衝突したときには、分布

$$f(p) = \frac{|p|}{T_\alpha} \exp\left(-\frac{p^2}{2T_\alpha}\right), \quad (\text{粒子 1 では } \alpha = L, p > 0, \text{ 粒子 } N \text{ では } \alpha = R, p < 0)$$

に従って運動量  $p$  を選び、跳ね返す。

いずれの熱浴でも、両端の温度を等しく ( $T_L = T_R$ ) 選べば、平衡状態が実現する。また、非平衡定常状態での熱流と温度勾配の関係については、熱浴の種類に関係なく前節で述べたことが実現していることを確認した。すなわち、(i) では熱伝導率が  $\kappa \propto N^\alpha$  のように発散するのに対し、(ii) では収束する。(iii) は可積分系なので温度勾配が形成されず、熱流は両端の熱浴の温度差に比例する。

### 3 数値計算

#### 3.1 相対エントロピーによるずれの大きさの定量化

我々は、定常状態における粒子  $i$  の運動量分布  $P_i(p)$  の Maxwell 分布

$$P_M(p; T_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T_i}} \exp\left(-\frac{p^2}{2T_i}\right)$$

からのずれを表す量として、相対エントロピー

$$S_i = \int_{-\infty}^{+\infty} P_i(p) \log \frac{P_i(p)}{P_M(p; T_i)} dp \quad (2)$$

を採用した。ただし、 $T_i$  は粒子  $i$  の運動論的温度  $T_i = \langle p_i^2 \rangle$  である。これは、相対エントロピーを最小にするような  $T_i$  を選ぶことに相当する。よく知られているように、相対エントロピーは非負の値を取る量で、0 になるのは 2 つの分布が全く同じ場合だけである。数值的に  $S_i$  を求めるには、運動量空間を離散化して粗視化した分布が得られたら、それに対する相対エントロピーを求め、粗視化を細かくした極限を考えればよい。現実には、分割を細かくしすぎるとサンプル数の有限性のためにかえって収束が悪くなり、 $10^3$  程度の分割でよい収束値が得られるので、それを考慮に入れて真の値を推定した。

正規分布からのずれを表す量としては、尖度 (kurtosis)  $\langle p_i^4 \rangle / \langle p_i^2 \rangle^2 - 3$  がよく用いられる。まず、この量と相対エントロピーの違いについて調べた。次の図 1 は相対エントロピーと尖度を粒子位置  $i$  に対してプロットしたものである。この図からわかるように、FPU モデルや  $\phi^4$  モデルでは相対エントロピーと尖度

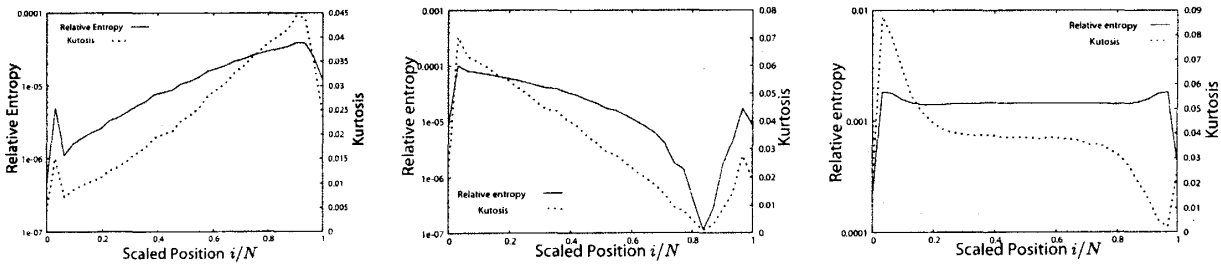


図 1: 粒子ごとの相対エントロピー (実線) と尖度 (点線)。左から、FPU モデル、 $\phi^4$  モデル、戸田格子の結果を示す。いずれも粒子数  $N = 32$ 、温度  $T_L = 2.0$ 、 $T_R = 1.0$  のランジュバン熱浴を用い、1 ステップの時間間隔  $dt = 0.01$  の 4 次 Runge-Kutta 法でシミュレーションを行って、定常に達した後の  $10^{10}$  ステップのデータから求めた。

が同じ傾向のプロファイルを描くのにに対し、戸田格子では両者が異なる振る舞いをする。これは、戸田格子では Maxwell 分布からの非対称なずれが存在するため、尖度だけでずれを定量化できないということを示している。また、熱浴の種類に関わらず、熱浴近傍で Maxwell 分布からのずれが最も大きくなることがわかる。このことは、両端近傍の状態はバルクの状態と異なるということを示唆しているように思われる。

系全体の局所平衡分布からのずれの指標として、全相対エントロピー

$$S = \sum_{i=1}^N S_i \quad (3)$$

を考え、熱浴の温度  $T_L, T_R$  を固定して系の大きさ  $N$  を変えたとき、 $S$  がどのように変化するかを調べた結果が次の図 2 である。この図から、戸田格子の場合にはシステムサイズ  $N$  に比例して全相対エントロ

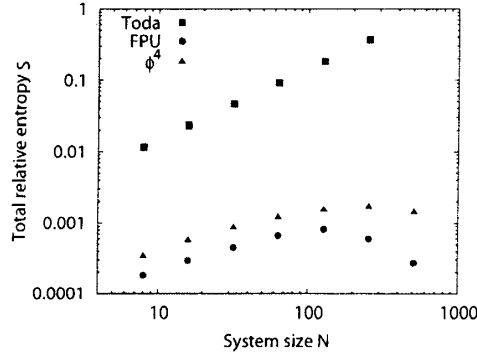


図 2: 全相対エントロピーの系の大きさに対する変化。

ピーが増大することがわかる。これは、粒子ごとのずれが  $N$  を変えても変わらないことを示しており、熱流が両端の熱浴の温度差だけで決まるという可積分系の性質の反映である。同様の結果は、武末が過去にセルオートマトンの系に対して得ている [3]。一方、FPU モデルと  $\phi^4$  モデルでは、熱伝導の振る舞いの違いから  $S$  の漸近挙動にも違いがあるものと予想されたが、明確にそのようなものを取り出すには至っていない。そのためには、より長時間で精度の良い計算が必要であると考えられる。

### 3.2 系の対称性とその破れ

平衡状態では、ポテンシャルの形状などに依らず運動量分布は常に Maxwell 分布であるが、非平衡定常状態ではそういった系の詳細が運動量分布に影響を与えるものと思われる。そこで、特に系の対称性とその破れが分布に及ぼす影響について考察してみよう。

すぐにわかるように、ポテンシャル  $U(q), V(q)$  が偶関数のとき、運動方程式は変位と運動量の符号を反転する変換に対して不変である。この性質は Langevin 熱浴や Nose-Hoover 熱浴を取り付けても変わらないが、熱壁はこの対称性を破る。したがって、 $U(q), V(q)$  が偶関数でかつ熱浴が Langevin または Nose-Hoover の場合は、運動量分布が偶関数になり、Maxwell 分布からのずれも偶関数となるが、(i) 相互作用ポテンシャルが非対称 ( $V(-q) \neq V(q)$ ) な場合、(ii) オンサイトポテンシャルが非対称 ( $U(-q) \neq U(q)$ ) な場合、(iii) 熱浴として熱壁を用いた場合には非対称なずれが起こりうる。そこで、この 3 種類の対称性の破り方で何か定性的な違いが見られるかどうかを、分布のずれ  $P_i(p) - P_M(p; T_i)$  を表示したり、3 次モーメント  $\langle p_i^3 \rangle$  を計算することにより調べてみた。

まず、相互作用ポテンシャルが非対称な場合を考える。図 3 は FPU モデルの場合とその相互作用ポテンシャルに 3 次の項を加えて対称性を破った場合のそれぞれにおける Maxwell 分布からのずれを表しており、予想通り相互作用ポテンシャルが非対称な場合にはずれも非対称になることが確認された。このずれは、すべての粒子で非対称項の大きさに比例する。

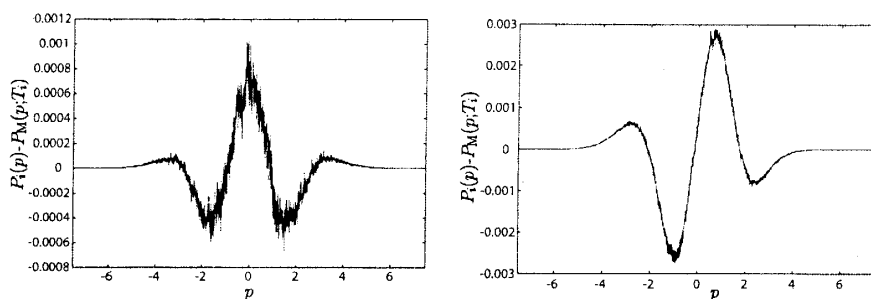


図 3: Maxwell 分布からのずれ。左は相互作用ポテンシャルが対称な場合 ( $V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{4}q^4, U(q) = 0$ )、右は相互作用ポテンシャルが非対称な場合 ( $V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{3}q^3 + \frac{1}{4}q^4, U(q) = 0$ ) を示す。粒子数は  $N = 32$ 、温度  $T_L = 2.0$ 、 $T_R = 1.0$  の Langevin 熱浴を用い、ほぼ系の中心に位置する粒子 16 の運動量分布からずれのみを取り出した。

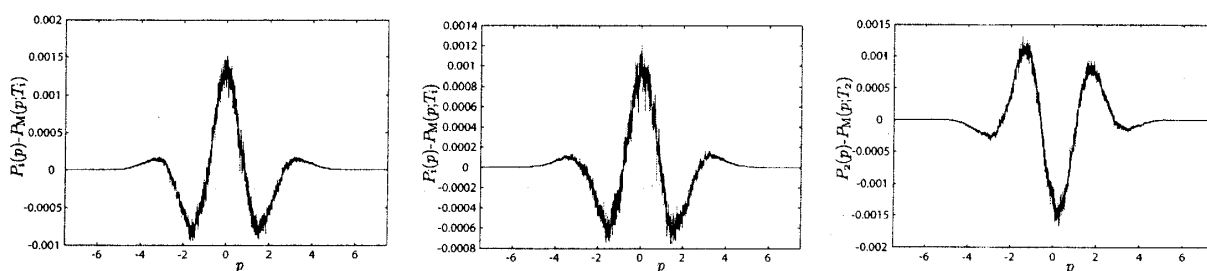


図 4: Maxwell 分布からのずれ。左はオンサイトポテンシャルが対称な場合 ( $V(q) = \frac{1}{2}q^2, U(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{4}q^4$ ) を示す。中央 (粒子 16) と右 (粒子 2) は非対称な場合 ( $V(q) = \frac{1}{2}q^2, U(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{3}q^3 + \frac{1}{4}q^4$ ) の運動量分布のずれ。計算方法は図 3 の場合と同じ。

次にオンサイトポテンシャルが非対称な場合を考える。図 4 はオンサイトポテンシャルが対称な場合と非対称な場合の Maxwell 分布からのずれを表す。この場合、系の中心近傍の粒子では、非対称性の影響は弱く、ごく小さなずれしか見られない。しかし、境界近傍の粒子では非対称なずれが見られ、このずれの大きさは非対称項の大きさに比例する (図 5)。これもまた、中心付近と境界近傍での状態の違いを示唆する結果である。

最後に、熱壁を用いて境界条件で対称性を破る場合を考えよう。図 6 は、FPU モデルと  $\phi^4$  モデルに対し、熱壁を熱浴として用いたときの 3 次モーメントの値を粒子ごとにプロットしたものである。ここで興味深いのは、 $\phi^4$  モデルでは熱壁による対称性の破れの効果は境界近傍に限定されているのに対して、FPU モデルでは中心付近までその効果が及び、3 次モーメントが 0 でない値を示すということである。この結果は、FPU では熱伝導率が発散するのに対して  $\phi^4$  モデルでは収束するということと関係のある性質であるように思われる。オンサイトポテンシャルの有無を運動量保存という観点だけで捉えるのではなく、境界条件の影響の及び方の違いに結びつけて、熱伝導率の発散・収束を議論することができるかもしれない。

## 4 今後へ向けて

本研究では、1 次元格子熱伝導系の定常状態における運動量分布を求め、Maxwell 分布からのずれを調べることで、系の熱力学的振る舞いとの関係について議論した。特に、系の対称性が破れるときの振る舞い

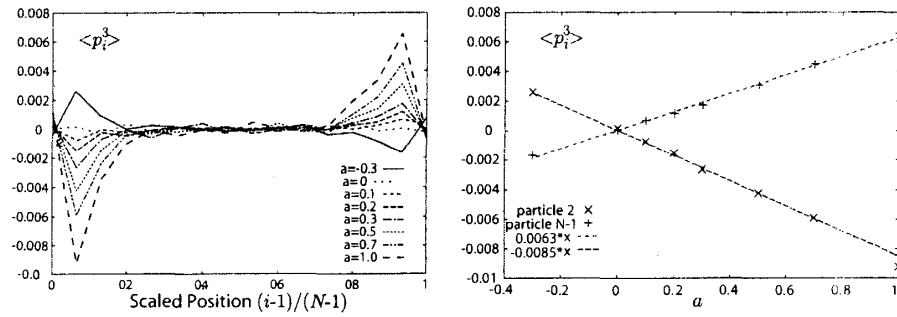


図 5:  $V(q) = \frac{q^2}{2}$ ,  $U(q) = \frac{q^2}{2} + a\frac{q^3}{3} + \frac{q^4}{4}$  として、オンサイトポテンシャルの非対称項の大きさ  $a$  を変化させたときの 3 次モーメントのプロファイルの変化 (左図) と、粒子 2,  $N-2$  の 3 次モーメントの値の変化 (右図)。パラメーター  $a$  の値は  $-0.3, 0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$ 。粒子数  $N = 16$ 、温度  $T_L = 2.0$ ,  $T_R = 1.0$  の Langevin 熱浴を用い、定常状態において  $10^{10}$  ステップの平均を行った。

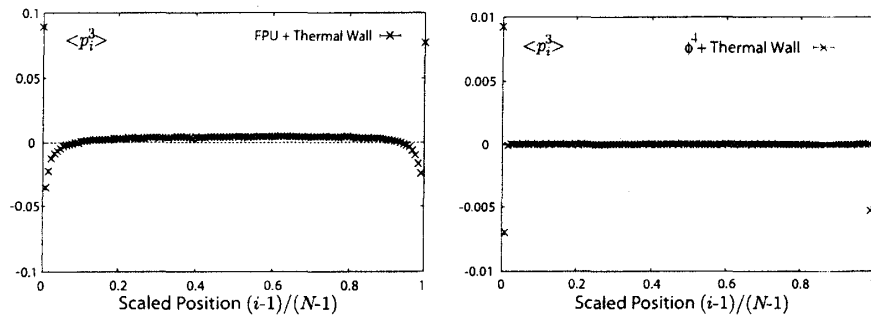


図 6: 熱壁を用いたときの 3 次モーメント  $\langle p_i^3 \rangle$  の値の空間変化。左は FPU モデル、右は  $\phi^4$  モデルの場合。粒子数は  $N = 256$ 。熱浴の温度は  $T_L = 2.0$ ,  $T_R = 1.0$ 。FPU では中心部分も 0 ではないが、 $\phi^4$  では境界近傍以外は 0 に近い。

を手がかりとして、境界の影響が及ぶ範囲がモデルによって異なるなど興味深い結果を得ることができた。FPU モデルの境界条件の影響を強く受ける性質がどのような物理と関係するか、また  $\phi^4$  モデルで示唆された境界近傍とバルクの状態の違いをどのように理解するかといったことが次の問題である。

また、非平衡定常分布を決めるパラメータは何かということも重要である。局所温度や熱流だけで分布が決まるものかどうか、モデルによる違いがあるかどうかということも考えていきたい。

さらに、1 粒子の運動量分布は分布として最も簡単なものであり、今後は粒子間の相関を調べていくことが必要となるであろう。このように、非平衡定常分布の性質を詳しく調べていくことは、最初に述べた非平衡定常系の統計力学の構築へ向けての重要な手がかりを与えるものとなると期待される。

## 参考文献

- [1] S. Lepri, R. Livi, A. Politi, *Phys. Rep.* **377**, 1 (2003).
- [2] C. Giardinà and J. Kurchan, cond-mat/0502485.
- [3] S. Takesue, *Proceedings of the International Conference on Dynamical Systems and Chaos* (World Scientific, 1995) Vol. 2, 118.